

MTR966 - Simulação Computacional de Materiais

Carga horária: 4 h/semana

Créditos: 4

Ementa:

Métodos computacionais em física clássicas: processos determinísticos e aleatórios. Introdução à termodinâmica estatística: ensemble, médias, conexão entre a descrição microscópica (atomística) e macroscópica. Simulação computacional de materiais baseada em potenciais de interação atomísticos. Método de Monte Carlo e de Dinâmica Molecular. Potenciais de interação intra- e intermoleculares. Aplicações a sistemas vítreos e sólidos iônicos: energética e estrutura. Migração iônica e de defeitos. Catalisadores e superfícies.

Bibliografia:

1. D. A. McQuarrie, *Statistical Thermodynamics*, University Science Body, (1973).
2. M. P. Allen & D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, (1989).
3. H. Gould & J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems. Part 2*. Addison-Wesley, (1988).
4. D. Frenkel & B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, (1996).
5. C. R. A. Catlow (Ed.), *Modelling of Structure and Reactivity in Zeolites*, Academic Press, (1992).
6. K. Ohno, K. Esfarjani & Y. Kawazoe, *Introduction to Computational Materials Science : From Ab Initio to Monte Carlo Methods* (Springer Series in Solid State Sciences, 129), Springer Verlag, (2000).